69 Erinnerung: • Trapezregel $S_n^{(1)}$

$$|I(f) - S_n^{(1)}(f)| \le \frac{h^2}{12} (b-a) \|f''\|_\infty$$

• Simpson-Regel $S_n^{(2)}$

$$|I(f) - S_n^{(2)}(f)| \le \frac{h^4}{90} (b-a) \|f^{(4)}\|_\infty$$

Heute: Aufwand & Effizienz (Bsp. Trapez/Simpson)

Trapezregel Anzahl der f-Auswertungen:

$$N^{(1)} = n+1 \le 2n$$

$$h = \frac{b-a}{n} \le (b-a)\frac{2}{N^{(1)}}$$

$$\Rightarrow |I(f) - S_n^{(1)}(f)| \le \frac{1}{3}(b-a)^3 \|f''\|_\infty \left(N^{(1)}\right)^{-2}$$

(20) Simpson-Regel : # f-Auswertungen

$$N^{(2)} = 2n+1 \leq 3n$$

$$h = \frac{b-a}{n} = (b-a)\frac{3}{N^{(2)}}$$

$$\left|I(f) - S_n^{(2)}(f)\right| \leq \frac{9}{10}(b-a)^5 \|f^{(4)}\|_\infty \left(N^{(2)}\right)^{-4}$$

$$\left|I(f) - S_n^{(1)}(f)\right| \leq \frac{1}{3}(b-a)^3 \|f^{(2)}\|_\infty \left(N^{(1)}\right)^{-2}$$

Ziel: Fehler $\leq \varepsilon$ (Toleranz)

Das gilt falls: $\left\lceil \left(\frac{1}{3}(b-a)^3 \|f^{(2)}\|_\infty\right)^{\frac{1}{2}} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \right\rceil = N^{(1)}(\varepsilon)$

$$\left\lceil \left(\frac{9}{10}(b-a)^5 \|f^{(4)}\|_\infty\right)^{\frac{1}{4}} \varepsilon^{-\frac{1}{4}} \right\rceil = N^{(2)}(\varepsilon)$$

F1 **Fazit:** • Für hohe Genauigkeit (d.h. $\varepsilon \ll 1$) ist die Simpson-Regel besser!

• Bei niedriger Genauigkeit kann $S_n^{(1)}$ besser sein, insbes. falls $\|f^{(2)}\|_\infty^2 \ll \|f^{(4)}\|_\infty$

Beispiel: Skript / Übung

(72) **Ausblick**: - Kann man die Stützstellen so wählen, daß die Ordnung maximal wird?

Ja: Gauß-QF sind exakt für $f \in P_{2n+1}$.

Besser geht es i.A. nicht.

→ Numerik 1

- Anpassender Teilintervallansatz

→ adaptive QF → Numerik 1

(73)

3 lineare gewöhnliche Differentialgleichungen (DGL)

gewöhnliche DGL → ODE

3.1 Motivation

- Newton'sche Mechanik
- Himmelsmechanik
- Moleküldynamik
- Reaktionskinetik

3.1.1 Bewegung eines Teilchens

- ein Teilchen
- konstante Geschwindigkeit v_0

74

$x(t)$: Position zum Zeitpunkt $t \geq 0$

$$v_0 = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = x'(t)$$

D.h. $x(t)$ löst die DGL

$$x'(t) = v_0 \qquad (*)$$

Lösung von $(*)$ ist gegeben durch

$$x(t) = v_0 t + \alpha$$

für jedes $\alpha \in \mathbb{R}$.

Um Eindeutigkeit zu erhalten benötigen wir einen <u>Anfangswert</u>.

(75) Anfangswertproblem

$$x'(t) = v_0 \quad \forall t > 0 \quad , \quad x(0) = x_0 \quad (3.21)$$

Eindeutige Lösung (Eindeutigkeit → Lösung)

$$x(t) = v_0 t + x_0$$

3.1.2 Radioaktiver Zerfall

- $x_0 \in \mathbb{R}$ Anzahl der Atome zum Zeitpunkt $t = 0$
- $x(t)$ — " — $t \geq 0$
- Wahrscheinlichkeit, daß ein Atom während eines kleinen Zeitraums Δt zerfällt ist

$$p \Delta t$$

75 p Zerfallskonstante (materialabhängig)

$$x(t+\Delta t) = x(t) - p\Delta t\, x(t)$$

$$\Rightarrow \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = -p\,x(t)$$

Grenzübergang $\Delta t \to 0$

$$x'(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = -p\,x(t)$$

$\Rightarrow$ GDGL

$$x'(t) = -p\,x(t) \qquad t > 0 \qquad (3.22)$$

(F7) Wir nehmen $x(t) \in \mathbb{R}$ an.

<u>Hypothese</u>: $x(t)$ kann abzl. Werte aus $\mathbb{R}$ annehmen

(Ok für $x(t) \gg 1$)

<u>Anfangswert</u>

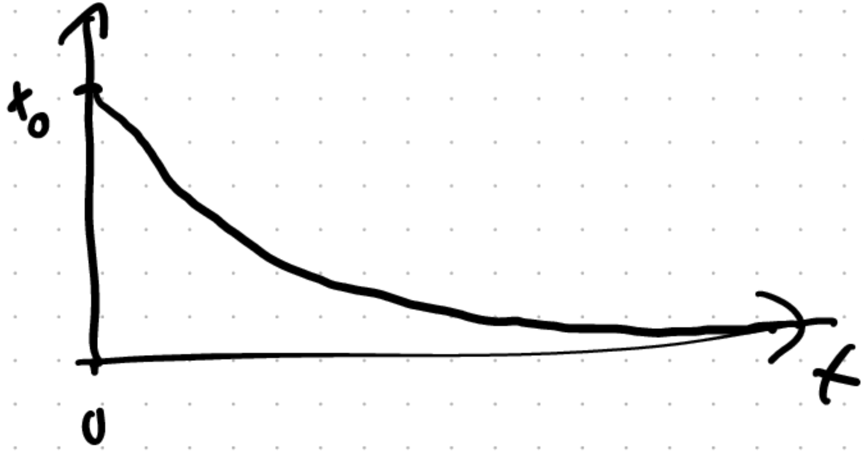
$$x(0) = x_0$$

$$\boxed{\underline{\text{AWP}} \quad x'(t) = -p\,x(t) \quad t>0, \quad x(0) = x_0.}$$

<u>Einsetzen</u>: $x(t) = x_0 e^{-pt}$ (3.23)

ist eine Lösung

(78)



$$x(t) = x_0 e^{-\rho t}$$

$$x(t) \xrightarrow[t \to \infty]{} 0$$

79

3.2 Lineare DGL 1. Ordnung

3.2.1 Existenz, Eindeutigk, Kondition

Wir betrachten die DGL

$$x'(t) = \lambda x(t) \qquad t > 0 \qquad (3.24)$$

mit gegebenem $\lambda \in \mathbb{R}$.

Diese DGL heißt

- gewöhnlich: nur Ableitungen nach einer Variable
- 1. Ordnung: — " — erster Ordnung auf t
- linear: Linearkombination von Lösungen sind Lösungen.

80

- x mit $x(t) = 0 \ \forall t$ (d.h. $x \equiv 0$)
  ist eine Lösung
- Für jedes $\alpha \in \mathbb{R}$ ist

$$x(t) = \alpha e^{\lambda t} \tag{3.25}$$

eine Lösung (Einsetzen):

$$x'(t) = \alpha \lambda e^{\lambda t} = \lambda x(t) \ \checkmark$$

<u>Satz 3.1</u> Alle Lösungen von (3.24) haben die Gestalt (3.25)

(81) <u>Beweis</u>: Sei $w(t)$ eine Lösung von (3.24),

d.h. $w'(t) = \lambda w(t)$.

Dann gilt

$$\frac{d}{dt}\left(w(t)e^{-\lambda t}\right) = w'(t)e^{-\lambda t} + w(t)(-\lambda)e^{-\lambda t}$$

$$\overset{(3.24)}{=} \lambda w(t)e^{-\lambda t} - \lambda w(t)e^{-\lambda t} = 0$$

D.h. $w(t)e^{-\lambda t}$ ist konstant, also gilt $w(t)e^{-\lambda t} = \alpha$ für ein $\alpha \in \mathbb{R}$

$$\Rightarrow w(t) = \alpha e^{\lambda t}. \qquad \square$$

(82) Bem. Die Lösungen von (3.24) bilden einen linearen Raum (Vektorraum).

Jetzt betrachten wir

$$x'(t) = \lambda x(t) + f(t) \qquad t \geq 0 \quad (3.26)$$

für gegebenes $\lambda \in \mathbb{R}$ und $f \in C[0,\infty)$.

Für $f \neq 0$ ist $x \equiv 0$ keine Lösung.

„Inhomogene rechte Seite" f